

Borsa di studio attivata ai sensi di quanto disposto dal D.M. n. 1061 del 10/08/2021

Titolo del progetto: Materiali 2D per applicazioni in dispositivi di accumulo dell'energia di nuova generazione

La borsa sarà attivata sul seguente corso di dottorato accreditato per il XXXVII ciclo:

MODELLI MATEMATICI PER L'INGEGNERIA, ELETTROMAGNETISMO E NANOSCIENZE

Responsabile scientifico: M.A. Navarra (Dip. Chimica) , C. Mariani (Dip. Fisica)

Area per la quale si presenta la richiesta: GREEN

Numero di mensilità da svolgere in azienda: 6

Azienda: Eco Recycling Srl, Via di Vannina, Roma

Il Dipartimento è disponibile a cofinanziare per un importo pari a euro: 7000

Dipartimento finanziatore: DIPARTIMENTO DI FISICA con delibera del 20 settembre 2021

Progetto di ricerca:

Il progetto si propone lo sviluppo di elettrodi innovativi basati su materiali di grafene modificati chimicamente (chemically modified graphenes, CMGs) e strutture tridimensionali di graphene related materials (GRMs), i quali combinino elevate area superficiale e conducibilità elettrica, da utilizzare in accumulatori elettrochimici agli ioni di litio.

L'interesse scientifico verso i CMGs e altri materiali 2D (ad es. calcogenuri dei metalli di transizione, fosforene, silicene, e carburi lamellari) è ormai passato dalla preparazione e caratterizzazione chimico-fisica al loro uso in applicazioni reali, quali le applicazioni nel settore della conversione e accumulo dell'energia (batterie, elettrolizzatori, celle a combustibile ...), dove la superficie esposta e la presenza di difetti del materiale svolgono un ruolo guida. L'uso dei GRMs può sicuramente dare una risposta alla richiesta di soluzioni per le problematiche legate alle crescenti esigenze energetiche. La realizzazione di nano-architetture ibride a base di GRMs chimicamente modificati ed organizzati in 3D, con difetti opportunamente progettati, è essenziale per creare nuovi nanomateriali multifunzionali finalizzati alle tecnologie di accumulo dell'energia per una crescita sostenibile della società. La principale area tematica del Piano nazionale della Ricerca nella quale ricade il progetto è sicuramente Energia, con potenziali ricadute nella Mobilità sostenibile e importanti collegamenti con la Chimica Verde. Nell'ambito del progetto è previsto un duplice impatto dirompente nel campo delle batterie:

i) la capacità specifica delle batterie convenzionali agli ioni di litio, basata su processi di intercalazione, sarà aumentata mediante l'uso al comparto anodico di grafene nano e microporoso a bassa concentrazione di difetti;

ii) la durata di vita e l'efficienza coulombica delle batterie Li-S di prossima generazione saranno affrontate adottando GRMs funzionalizzati come materiali catodici unitamente allo zolfo, risolvendo il problema della dissoluzione dei polisolfuri mediante interazioni superficiali metallo-zolfo.

Entrambi gli impatti sono di fondamentale importanza per lo sviluppo di tecnologie di accumulo dell'energia sostenibili.

La modificazione superficiale e la funzionalizzazione dei GRMs investigati sarà sviluppata al Dipartimento di Fisica grazie allo studio spettro-microscopico delle proprietà elettroniche e vibrazionali mediante spettroscopia micro-Raman risolta spazialmente e spettroscopia a raggi X e

fotoelettronica UV. Le potenzialità, per applicazioni in batterie, verranno invece investigate presso il Dipartimento di Chimica dove il/la dottorando/a procederà alla realizzazione di elettrodi self-standing a base di GRMs, alla definizione di opportune configurazioni di cella e test elettrochimici, allo studio della composizione dell'elettrolita e cicli di carica/scarica in batterie prototipo. La sostenibilità dei nuovi dispositivi di accumulo proposti, a base di GRMs, sarà affrontata grazie alla collaborazione con l'impresa Eco-Recycling, che ospiterà il/la dottorando/a, mettendo a disposizione le proprie competenze nello studio del Life Cycle Assessment (LCA) e Life Cycle Cost (LCC) di tecnologie emergenti, nonché nel riciclo di materiali funzionali ad alto valore aggiunto, ad esempio quelli di recupero da batterie esauste.

Titolo del progetto (inglese): 2D materials for applications in new-generation energy-storage devices

Progetto di ricerca (inglese):

This project aims at developing new advanced electrodes based on chemically modified graphene (CMG) and on three-dimensional (3D) structures of graphene related materials (GRMs), which combine very high surface areas with high electrical conductivity, to be used in lithium-ion based electrochemical accumulators.

The scientific interest toward CMGs and other 2D material (like for instance transition metal dichalcogenides, phosphorene, silicene, lamellar carbides) has already moved from the preparation and chemical-physical characterization to their use in real applications, like applications in the areas of energy conversion and energy storage (batteries, electrolyzers, fuel cells, ...). In these materials, both the exposed surface and the presence of defects can play a leading role. The use of GRMs can surely give an answer to the request for solutions to the problems linked to the growing energy needs. The realization of hybrid nano-architectures based on chemically modified and 3D organized GRMs, with appropriately tailored defects, is essential to create new multifunctional nanomaterials aimed at new energy storage technologies, for a sustainable growth of the society. The main thematic area of the National Research Plan in which this project falls is certainly Energy, with potential consequences on sustainable mobility and with important links with Green Chemistry.

Within this project we foresee a double disruptive impact in the field of batteries: i) the specific capacity of conventional lithium-ion batteries, based on intercalation processes, will be increased by using nano- and micro-porous graphene with low defect concentration, in the anodic compartment; ii) the lifespan and coulombic efficiency of next generation Li-S batteries will be addressed by using GRMs functionalized as cathode materials, together with sulfur, solving the problem of dissolution of polysulphides through metal-sulfur surface interactions. Both impacts are of fundamental importance for the development of sustainable energy storage technologies.

The surface modification and the functionalization of the investigated GRMs will be developed at the Department of Physics thanks to the spectro-microscopic study of the electronic and vibrational properties, by spatially resolved micro-Raman spectroscopy and micro-X-ray and UV photoelectronic spectroscopy. The potentiality for applications in batteries will be investigated at the Department of Chemistry, where the PhD student will contribute to the realization of self-standing electrodes based on GRMs, to the definition of appropriate cell configurations and electrochemical tests, to the study of the electrolyte composition and charge/discharge cycles in prototype batteries.

The sustainability of the proposed new storage-devices based on GRMs, will be addressed thanks to the collaboration with the Eco-Recycling company, which will host the PhD student, making available their skills in the study of the Life Cycle Assessment (LCA) and Life Cycle Cost (LCC) of emerging technologies, as well as in the recycling of functional materials with high added value, such as those recovered from the exhausted batteries.